

APLICACION DE LA COMPUTACION AL CALCULO DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS

Saavedra L., Francisco D., M Sc. Ing. Mecánico Universidad de Carabobo. Facultad de Ingeniería. Escuela de Ingeniería Mecánica. Departamento de Térmica y Energética. Bárbula, Carabobo 2008, Venezuela. TeleFax 0241- 8672814.

Resumen

Desde el año 1982 se han venido desarrollando en la Escuela de Ingeniería Mecánica de la Universidad de Carabobo algoritmos de cálculo para determinar las Propiedades Termodinámicas de diferentes Sustancias Puras. Hasta ahora se han presentado nueve (9) Trabajos (Cristiano, Saavedra y otros 1984; Agudelo y Durán 1985; Colán 1985; Saavedra y Cristiano 1987; Cristiano y Saavedra 1988; Saavedra y Cristiano 1991; Ramis y Vera 1992; Saavedra y Cristiano 1993; Saavedra 1993) los cuales han centrado su atención en el desarrollo de Programas de Computación para calcular las Propiedades Termodinámicas de esas Sustancias Puras. Este Trabajo presenta un Programa de Computación, desarrollado y compilado en BASIC PDS ver. 7.1, capaz de calcular las Propiedades Termodinámicas; Temperatura o Presión, Volumen Específico, Energía Interna Específica, Entalpía Específica y Entropía Específica, de las Sustancias Puras siguientes: Aire Seco, Alcohol Propílico, Agua, Amoníaco, Argón, Butano, Dióxido de Carbono, Etano, Etileno, Heptano, Hexano, Hidrógeno, Iso-Butano, Iso-Pentano, Mercurio, Metano, Nitrógeno, Octano, Oxígeno, Pentano, Propano, Propileno y Refrigerantes 11, 12, 13, 14, 22, 23, 114, C-318, 500, 502 y 503. Este Programa es aplicable en cualquier Micro-Computador que acepte el MS-DOS y tabula las Propiedades Termodinámicas en los intervalos de Temperatura y Presión que el usuario desee. El error que se comete en el cálculo de las Propiedades es menor al 2%.

1. INTRODUCCION

El objetivo principal de este Artículo es presentar un procedimiento para determinar las propiedades termodinámicas en los estados de saturación y sobrecalentamiento y un programa de computación capaz de calcular y tabular esas Propiedades para una Sustancia Pura seleccionada en los intervalos e incrementos de presión y temperatura que el usuario seleccione y a una temperatura de referencia preestablecida.

2. PROCEDIMIENTO GENERAL DE CALCULO PARA DETERMINAR LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS

Para obtener las propiedades termodinámicas en los estados de saturación y sobrecalentamiento es necesario conocer un conjunto de ecuaciones empíricas o modelos matemáticos obtenidas a partir de experiencias de laboratorio. Ese conjunto de ecuaciones es particular de cada sustancia pura.

2.1.- Procedimiento de cálculo para determinar las propiedades termodinámicas en el estado de saturación.

Para determinar las propiedades termodinámicas en el estado de saturación (Reynolds 1979; Saavedra 1993) se deben conocer cuatro ecuaciones empíricas; la ecuación que determina el calor específico a volumen específico

constante para densidades o presiones muy bajas, la ecuación de estado Virial que representa el comportamiento de la sustancia pura en la fase gaseosa, la ecuación que representa la variación de la presión de vapor con la temperatura, presión de saturación, y la ecuación que determina el valor de la densidad del líquido saturado para diferentes temperaturas de saturación, es decir:

$$Cv(T), P = f(\rho, T),\ Psat = g(T)\ \text{y}\ \rho f .= \varnothing(T)$$

respectivamente.

Con el propósito de ilustrar este procedimiento de cálculo, se muestra en la Figura 1 un diagrama de flujo del mismo.

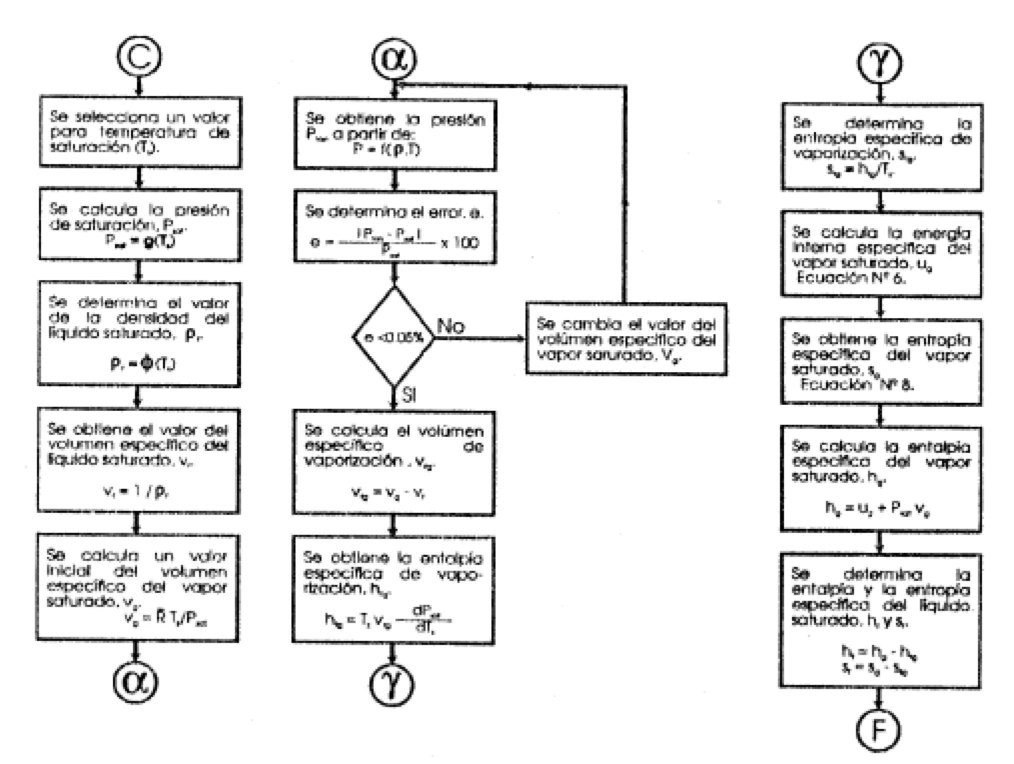


Figura l.- Diagrama de Flujo para Determinar las Propiedades Termodinámicas en el Estado de Saturación.

Los pasos que deben seguirse para cumplir este procedimiento se exponen a continuación:

1.- Se selecciona un valor de la temperatura de saturación, T_s.

2.- Se calcula la presión de saturación.

3.- Se determina la densidad del líquido saturado, ρf

4.- Se sustituye ρf en la expresión $v_f = 1/\rho f$ y se determina el volumen específico del líquido saturado.

5.- Se calcula el volumen específico del vapor saturado a partir de la ecuación de estado Virial. Como el volumen específico del vapor saturado ($vg = 1/\rho f$) está implícito en la ecuación de estado Virial, se necesita de un método de ensayo y error (Saavedra 1993) para determinar ese volumen específico (vg). Para ello se procede de la forma siguiente:

5.a.- Con la temperatura de saturación (T_s) y la presión de saturación (P_{sat}), se calcula el volumen específico del vapor saturado (v_g) a partir de la ecuación de estado para un gas ideal.

$$Vg = \frac{\bar{R}Tg}{P_{sat}}$$

5.b.- Se sustituyen los valores de la temperatura de saturación (T_s) y el volumen específico del vapor saturado (v_g) en la ecuación de estado Virial y se determina una presión de tanteo (P_{tan}).

5.c.- Se determina el error o la convergencia a partir de:

$$e = \frac{|P_{tan} - P_{sat}|}{P_{sat}} \text{ x } 100$$

5.d.- Se verifica si el error es menor que 0.05%. Si es así, se concluye el tanteo, sino, se varía el valor del volumen específico (v_g) hasta que se consiga un error menor al 0.05%.
6.- Se determina el valor del volumen específico de vaporización (v_{fg}) a partir de:

$$Vfg = Vg - Vf$$

7.- Se calcula el valor de la entalpía específica de vaporización a partir de la ecuación de Clausius-Clapeyron.

$$hfg = T_s Vfg \frac{dp_{sat}}{dT_s}$$

8.- Se determina la entropía de vaporización (s_{fg}) a partir de:

$$Sfg = \frac{hfg}{T_s}$$

9.- Se obtiene el valor de la energía interna específica del vapor saturado (u_g), mediante la ecuación siguiente:

$$Ug = \int_{To}^{Ts} Cv(Ts)dT + \int_{o}^{\rho} \frac{1}{\rho 2}\left[P - Ts(\frac{\partial P}{\partial T})\rho\right] d\rho + Uo$$

donde $C_v(T_s)$ es la ecuación que determina el valor del calor específico a volumen específico constante y uo es la energía interna específica de referencia.
10.- Se calcula el valor de la entropía específica del vapor saturado (s_g) a partir de la ecuación siguiente:

$$Sg = \int_{To}^{Ts} Cv(Ts)dT - \bar{R}Ln\rho + \int_{o}^{\rho} \frac{\bar{R}}{\rho} d\rho - \int_{o}^{\rho}\left[\frac{1}{\rho^2}(\frac{\partial P}{\partial Ts})\rho\right] d\rho + So$$

donde $C_v(T_s)$ es la ecuación que determina el valor del calor específico a volumen específico constante y s_0 es la entropía específica de referencia. La ecuación anterior también se puede escribir así:

$$Sg = \int_{To}^{Ts} Cv(Ts)dT - \bar{R}Ln\rho + \int_{o}^{\rho} \frac{\bar{R}}{\rho} d\rho - \int_{o}^{\rho} \frac{1}{\rho^2}\left[(\rho\bar{R} - \frac{\partial P}{\partial Ts})\rho\right] d\rho + So$$

11.- Se determina la entalpía específica del vapor saturado a partir de:

$$h_g = U_g + P_{sat}V_g$$

12.- Se calculan la entalpía específica y la entropía específica del líquido saturado, usando las relaciones siguientes:

$$hf = hg - hfg$$

y

$$Sf = Sg - Sfg$$

Siguiendo este procedimiento de cálculo se pueden determinar las propiedades termodinámicas para el estado de saturación de cualquier sustancia pura.

2.2.- Procedimiento de cálculo para determinar las propiedades termodinámicas en el estado de sobrecalentamiento.

Para obtener las propiedades termodinámicas en el estado de sobrecalentamiento (Reynolds 1979; Saavedra 1993) se deben conocer dos de las cuatro ecuaciones empíricas, es decir:

$$Cv\ (T)\ \text{y}\ P = f(\rho, T)$$

Este procedimiento de cálculo es esencialmente el mismo que el presentado en el apartado 2.1, eliminando los pasos 2,3,4,6, 7,8 y 12 e iniciando el cálculo para unos valores de temperatura (T) y presión (P).

3. PROGRAMA DE COMPUTACION TATERMO

La palabra TATERMO es una conjunción de las palabras Tablas Termodinámicas, nombre que usualmente se da a las tablas de las propiedades termodinámicas de cualquier sustancia pura.
TATERMO es un programa de computación concebido para elaborar las tablas de las propiedades termodinámicas de treinta y tres sustancias puras; treinta y dos de esas sustancias pueden desarrollar sus tablas termodinámicas para los estados de saturación a temperatura de saturación, cuatro sustancias puras pueden construir sus tablas termodinámicas también en los estados de saturación, pero para presiones de saturación y treinta y tres sustancias puras pueden conformar sus tablas termodinámicas en la fase gaseosa o estado de sobrecalentamiento (Saavedra y Cristiano 1991; Saavedra y Cristiano 1993; Saavedra 1993).
TATERMO es un programa desarrollado para elaborar tablas termodinámicas en intervalos específicos de temperatura y presión a incrementos deseados y a temperaturas de referencia preestablecidas. Este programa puede ser empleado en cualquier microcomputador, PC, XT, AT, que trabaje con cualquier versión del Sistema Operativo MS-DOS.

3.1.- Estructura del programa TATERMO.

El programa TATERMO lo constituyen cinco módulos y un archivo de datos (Saavedra 1993). Ver Figura 2. Estos módulos son:

TATERMO.EXE, COMBUST.EXE, MISCELA.EXE, REFRIGE.EXE y BRT7IEFR.EXE, y el archivo de datos es TABLAS.DAT.
Cada módulo tiene una función específica de importancia para el programa TATERMO. Las funciones de los módulos son las siguientes:
TATERMO.EXE. Este módulo, diseñado con el compilador BASIC PDS ver 7.1, tiene como objetivo principal hacer la presentación en pantalla del programa TATERMO exponiendo las diferentes opciones del programa y direccionando las ejecuciones necesarias hacia los módulos que procesan los datos que darán como resultado las tablas termodinámicas.
COMBUST.EXE. Este módulo se encarga de calcular las propiedades termodinámicas de las sustancias puras siguientes: Butano, Etano, Etileno, Heptano, Hexano, Isobutano, Metano, Octano, Pentano, Propano y Propileno, de acuerdo a las instrucciones y opciones seleccionadas en el módulo TATERMO.EXE.

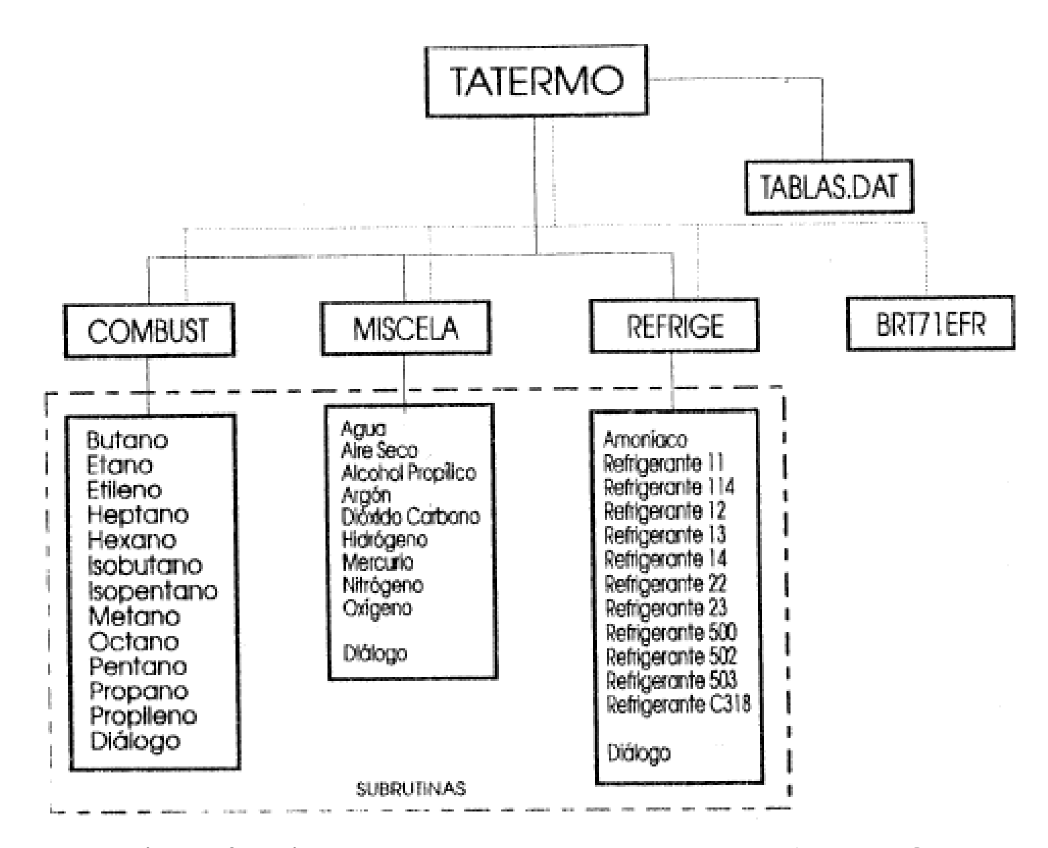


Figura 2.- Diagrama de Bloques del Programa TATERMO.

MISCELA.EXE. Este módulo de cálculo se encarga de determinar las propiedades termodinámicas de las sustancias puras siguientes: Agua, Aire Seco, Alcohol Propílico, Argón, Dióxido de Carbono, Hidrógeno, Mercurio, Nitrógeno y Oxígeno, también dadas las instrucciones y opciones del módulo de presentación TATERMO.EXE.
REFRIGE.EXE. Este módulo ejecuta los cálculo necesarios para obtener las propiedades termodinámicas de las sustancias puras siguientes: Amoníaco y Refrigerantes 11, 114, 12, 13, 14, 22, 23, 500, 502, 503 y C318, de acuerdo a las opciones señaladas en el módulo TATERMO.EXE.
BRT7IEFR.EXE. Este módulo se encarga de enlazar el módulo de presentación TATERMO.EXE con cualquier módulo de cálculo, COMBUST.EXE, MISCELA.EXE, y REFRIGE.EXE, y viceversa.
El archivo de datos TABLAS.DAT contiene todos los intervalos de temperatura y presión que por defecto puede ejecutar, si así se desea, el módulo TATERMO.EXE para elaborar las tablas de las propiedades termodinámicas de las treinta y tres sustancias puras. No se recomienda el cálculo de las propiedades para valores fuera de estos intervalos.

Los módulos de cálculo, COMBUST.EXE, MISCELA.EXE, y REFRIGE.EXE están constituidos por un conjunto de subrutinas de nombres iguales a las sustancias puras que contienen, las cuales son las que determinan realmente las propiedades termodinámicas en los estados de referencia, saturación y sobrecalentamiento, según el caso que seleccione el módulo de presentación TATERMO.EXE. Adicionalmente estos módulos de cálculo contienen una subrutina de nombre DIALOGO, la cual se encarga de informar al usuario acerca de los errores que se comenten en la entrada de datos y/o ejecución de los módulos de cálculo.

3.1.1.- Manejo básico del programa TATERMO.

TATERMO es un programa de manejo fácil. Inclusive puede ser operado con la acción de un ratón (mouse). Si el usuario no posee ratón, las teclas que debe tomar en consideración para manejar este programa son las siguientes (Saavedra 1993):

[BARRA ESPACIADORA]: Para confirmar la selección <OK> que aparece en algunas ventanas.
[ENTER]: Para activar la opción seleccionada.
[ALT]: Para activar el menú de barras.
[TAB]: Para moverse en una ventana activa.
[SHIFT] + [TAB]: Para moverse en sentido contrario en una ventana activa.
[ESC]: Para cancelar la opción seleccionada o alguna ventana activa.
Y las teclas direccionadoras del cursor.

En el caso de la pantalla que se presenta en la Figura 3, que aparece cuando se instala el programa TATERMO, puede cambiarse el monitor pulsando la tecla [TAB], y una vez seleccionado se pulsa [ENTER] o [BARRA ESPACIADORA] y aparecerá la pantalla de presentación del programa TATERMO que se muestra en la Figura 4, la cual desaparecerá en pocos segundos o, si se desea cancelarla, se pulsa [BARRA ESPACIADORA] y aparecerá el menú de barras que se encuentra en la Figura 5, la cual puede activarse con la tecla [ALT].

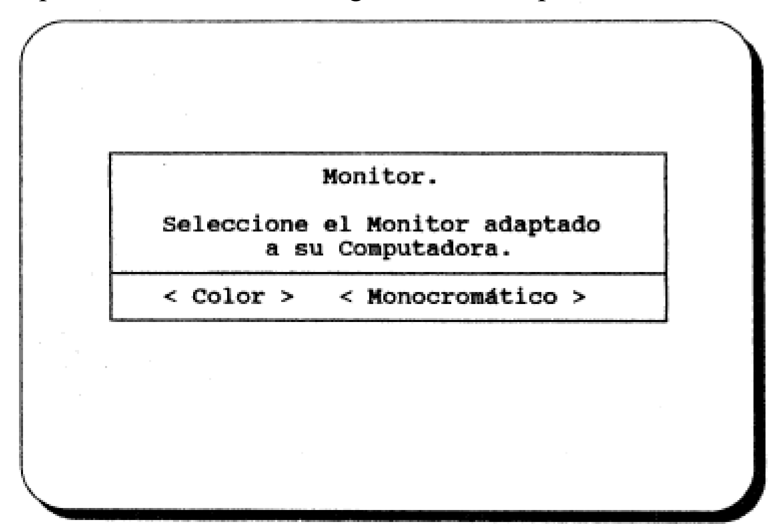


Figura 3.- Selección del Monitor.

3.2.- Presentación del programa TATERMO

El menú principal del programa TATERMO, compuesto por un menú de barras, el cual se muestra en la pantalla de la Figura 5, contiene 5 opciones, Tablas, Impresión, Opciones, Presentación y Salida (Saavedra 1993), y las funciones de éstas son:

a. Tablas. Esta opción presenta un submenú que da al usuario la posibilidad de elaborar tablas de propiedades termodinámicas para temperatura de saturación, presión de saturación o estado de sobrecalentamiento. La Figura 6 muestra el submenú de esta opción.
b. Impresión. La opción impresión brinda al usuario la posibilidad de obtener la impresión por impresora o pantalla de los valores de las propiedades termodinámicas de una tabla elaborada y grabada con anterioridad.



Figura 4.- Presentación del Programa TATERMO.

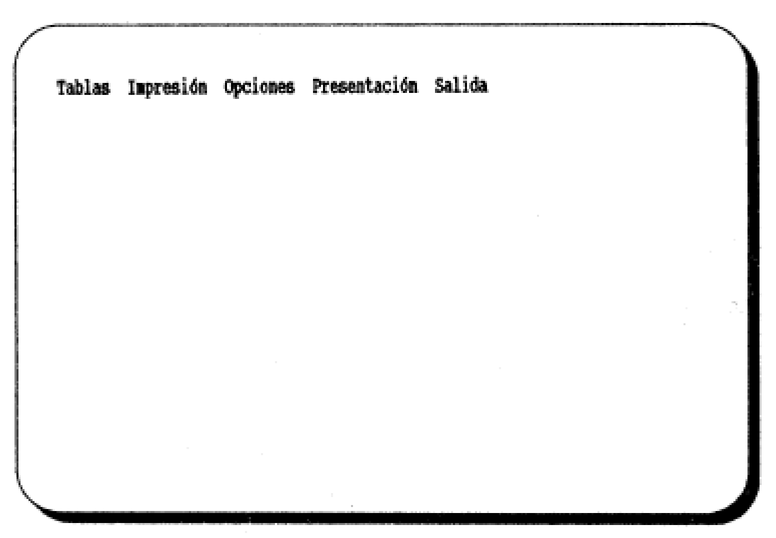


Figura 6.- Submenú Tablas.

c. Opciones. Da al usuario la posibilidad de cambiar de tipo de monitor y las lectoras donde se encuentran los módulos de presentación, cálculo y enlace y los archivos de datos.
d. Presentación. Facilita al usuario el aprendizaje para manejar con cierta facilidad el programa TATERMO.
e. Salida. Con esta opción se finaliza la tarea que estuvo realizando TATERMO. Tiene a su vez tres opciones para salir hacia el sistema operativo.

4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.

a) Se desarrolló un método de ensayo y error (Saavedra 1993) necesario para calcular el volumen específico de una sustancia pura a una presión y temperatura dadas. Tomando como variable la presión para cerrar el proceso de cálculo por tanteo. El error relativo que se comete en el mismo es menor a 0.05%.
b) El tiempo que toma el programa en calcular el valor de las propiedades termodinámicas para un estado definido es menor a 5 segundos (Saavedra 1993), incluyendo presentaciones en pantalla y grabación en disco. Siempre y cuando se emplee un microcomputador AT-286 con un coprocesador matemático.
c) Se desarrollaron y codificaron en BASIC los modelos matemáticos que calculan los valores de las propiedades termodinámicas de las sustancias puras siguientes (Saavedra 1993): Aire Seco, Alcohol Propílico, Agua, Amoníaco, Argón, Butano, Dióxido de Carbono, Etano, Etileno, Heptano, Hexano, Hidrógeno, Iso-Butano, Iso-Pentano, Mercurio, Metano, Nitrógeno, Octano, Oxígeno, Pentano, Propano, Propileno y Refrigerantes 11, 12, 13, 14, 22, 23, 114, C-318, 500, 502 y 503.
d) Los resultados de las propiedades termodinámicas calculadas en este trabajo fueron comparados con aquellos obtenidos por Reynolds (Reynolds 1979). Los errores relativos que se cometieron en los cálculos realizados en todos los casos son menores al 2%, presentando el mayor error para la entropía específica. En cualquier caso el error relativo que se comete en el proceso de cálculo de tanteo para la presión es menor a 0.05%.
e) Para este año deben incluirse en TATERMO los refrigerantes sustitutos desarrollados por DuPont Chemicals. SUVA MP39, SUVA MP66, SUVA 134a, SUVA HP80 y SUVA HP81.

5. REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

1.- AGUDELO, ALONSO y DURAN, JOSE. 1985. "Tablas Termodinámicas - Parte II". Escuela de Ingeniería Mecánica, Universidad de Carabobo, Venezuela. Profesor Asesor: Francisco Saavedra.

2.- COLAN, LUIS. 1985. "Tablas Termodinámicas - Parte I". Escuela de Ingeniería Mecánica, Venezuela. Profesor Asesor: Francisco Saavedra.

3.- CRISTIANO, FERNANDO; SAAVEDRA, FRANCISCO; ROMAN, HECTOR; ALCALA, RICHARD; y DE POOL, CLARA. 1984. "Tablas de Propiedades Termodinámicas: Agua, Amoníaco y Refrigerantes 11, 12 y 22". 1era y 2da Edición, Facultad de Ingeniería, Universidad de Carabobo, Venezuela.

4.- CRISTIANO, FERNANDO y SAAVEDRA FRANCISCO. 1988. "Tablas Termodinámicas I". Escuela de Ingeniería Mecánica, Universidad de Carabobo, Venezuela.

5.- RAMIS, RAFAEL y VERA, AQUILES. 1992. "Elaboración de Diagramas Termodinámicos a través del Uso de Computadoras". Escuela de Ingeniería Mecánica, Universidad de Carabobo, Venezuela. Profesor Asesor: Francisco Saavedra.

6.- REYNOLDS, WILLIAM C. 1979. "Thermodynamics Properties in SI. Graphs, Tables and Computational Equations for Forty Sustances". Departament of Mechanical Engineering, Stanfort University, California, E.E.U.U.

7.- SAAVEDRA, FRANCISCO y CRISTIANO, FERNANDO. 1987. "Tablas Termodinámicas II". Escuela de Ingeniería Mecánica, Universidad de Carabobo, Venezuela.

8.- SAAVEDRA, FRANCISCO y CRISTIANO, FERNANDO. 1991. "Tablas Termodinámicas 29 Sustancias". Escuela de Ingeniería Mecánica, Universidad de Carabobo, Venezuela.

9.- SAAVEDRA, FRANCISCO y CRISTIANO, FERNANDO. 1993. "Tablas Termodinámicas de 33 Sustancias Puras". Escuela de Ingeniería Mecánica, Universidad de Carabobo, Venezuela.

10.- SAAVEDRA, FRANCISCO. 1993. "Aplicación de la Computación al Cálculo de las Propiedades Termodinámicas Mediante el Uso de los Compiladores Quick BASIC ver 4.5 y BASIC PDS ver 7.1". Escuela de Ingeniería Mecánica, Universidad de Carabobo, Venezuela.

6.- Nomenclatura

R	=	Constante particular de los gases.
Cv(T)	=	Función del calor específico a volumen específico constante para presiones o densidades bajas, dependiente de la temperatura.
T	=	Temperatura absoluta.
P	=	Presión absoluta.
ρ	=	Densidad.
Psat	=	Presión de saturación.
ρ_f	=	Densidad del líquido saturado.
Ts	=	Temperatura absoluta de saturación.
v_f	=	Volumen específico de líquido saturado.
v_g	=	Volumen específico del vapor saturado.
P_{tan}	=	Presión absoluta de tanteo.
e	=	Error relativo.
v_{fg}	=	Volumen específico de vaporización.
h_{fg}	=	Entalpía específica de vaporización.
s_{fg}	=	Entropía específica de vaporización.
u^g	=	Energía interna específica del vapor saturado.
u_o	=	Energía interna específica de referencia.
s_g	=	Entropía específica del vapor saturado.
s_o	=	Entropía específica de referencia.
h_g	=	Entalpia específica del vapor saturado.
h_f	=	Entalpia específica del líquido saturado.
s_f	=	Entropía específica del líquido saturado.
v	=	Volumen específico del vapor.
u	=	Energía interna específica del vapor.
s	=	Entropía específica del vapor.
h	=	Entalpía específica del vapor.

NOTA: Para solicitar un disquete con el programa TATERMO y el manual de Usuario puede comunicarse con el autor a la dirección y/o teléfono que aparece en el encabezado.